

FORSCHUNGSZENTRUM JÜLICH GmbH
Zentralinstitut für Angewandte Mathematik
D-52425 Jülich, Tel. (02461) 61-6402

Interner Bericht

**Verbund der Supercomputer-Zentren
in Deutschland
- Ansichten, Einsichten, Aussichten -**

Friedel Hoßfeld

FZJ-ZAM-IB-9804

April 1998

(letzte Änderung: 09.04.98)

Preprint: Erscheint in den Proceedings der Tagung „Supercomputer 98“,
Mannheim, 18. - 20.6.1998.

Verbund der Supercomputer-Zentren in Deutschland

– Ansichten, Einsichten, Aussichten –

F. Hoßfeld

Zentralinstitut für Angewandte Mathematik
Forschungszentrum Jülich GmbH
E-Mail: f.hossfeld@fz-juelich.de

Zusammenfassung. Eine für den BMBF erstellte Studie analysiert, inwiefern der Verbund der Supercomputer-Zentren die ständig erneuerbare Plattform für die notwendige Intensivierung der Wechselwirkungen mit und zwischen den vielfältigen Kompetenzzentren in Hochschulen und Forschungszentren und mit der Industrie liefern kann. Trotz der Einsicht in die Notwendigkeit umfassender Konzeptionen und tatkräftiger Initiativen von Wissenschaft, Wirtschaft und Politik zur nachhaltigen Stärkung des wissenschaftlichen Rechnens als zukunftsweisender Schlüsseltechnologie beschränkt sich diese Analyse bewußt auf das heute machbar Erscheinende. Daraus sollen einige Ansichten, Einsichten und Aussichten aufgezeigt werden.

Vorbemerkung

Im Dezember 1995 wurde vom BMBF der Vorschlag gemacht, in einer Machbarkeitsanalyse die Einbettung der Höchstleistungsrechenzentren im Wissenschaftsbereich in einen Meta-computing-Verbund unter dem Gesichtspunkt der Bereitstellung höchster Rechenleistung für Hochschulen, für Forschungseinrichtungen und soweit möglich für Wirtschaftsunternehmen zu untersuchen. Der Autor hat auftragsgemäß als Direktor des Zentralinstitutes für Angewandte Mathematik (ZAM) des Forschungszentrums Jülich für die Erstellung dieser (vom BMBF über den Projektträger Informationstechnik unter der Projektbezeichnung VESUZ mit dem Kennzeichen '01 IR 602/9' geförderten) Machbarkeitsanalyse die Federführung übernommen. Die Herren Prof. Dr. Peter Deuflhard, Präsident des Konrad-Zuse-Zentrums in Berlin (ZIB), Prof. Dr. Heinz-Gerd Hegering, Leiter des Leibniz-Rechenzentrums (LRZ) in München, Prof. Dr.-Ing. Roland Rühle, Leiter des Rechenzentrums der Universität Stuttgart (RUS) an der Erstellung der Machbarkeitsanalyse intensiv mitgewirkt. Prof. Deuflhard ist dabei zeitweise durch Herrn Dipl.-Math. Jürgen Gottschewski, ehemals Leiter des Bereiches Rechenzentrum des ZIB, vertreten worden. Die Koordination und Redaktion lagen in den Händen von Herrn Prof. Dr. Wolfgang E. Nagel, ZAM (jetzt: Leiter des Zentrums für Hochleistungsrechnen an der Technischen Universität Dresden). Darüber hinaus haben die Herren Prof. Dr. Burkhard Monien, Universität-Gesamthochschule Paderborn, zeitweilig vertreten durch Herrn Dr. Alexander Reinefeld, und Klaus Ullmann, Wissenschaftlich-technischer Geschäftsführer, Deutsches Forschungsnetz (DFN) bei den die Einbeziehung der Kompetenzzentren für Wissenschaftliches Rechnen bzw. die Datenkommunikation betreffenden Fragen an der Machbarkeitsanalyse nachhaltig mitgewirkt. Die Machbarkeitsanalyse wurde im Dezember 1997 im BMBF präsentiert und unter dem Titel "Verbund der Supercomputer-Zentren in Deutschland – eine Machbarkeitsanalyse –" mit dem Datum Oktober 1997 für die Verteilung freigegeben; sie ist vom Autor auf Wunsch entweder gebunden oder elektronisch erhältlich.

1 Motivation und Zielsetzung

In Deutschland erfährt das *High Performance Scientific Computing (HPSC)* derzeit keine ausdrückliche programmatische Förderung. Dagegen startet die US-Regierung über die Programme und Maßnahmen im Rahmen der *Partnerships for Advanced Computational Infrastructure Initiative (PACI)* der National Science Foundation hinaus mit der *Accelerated Strategic Computing Initiative (ASCI)*, dem *Pathforward Program* und dem *High Performance Computing Modernization Program (HPCMP)* des DoE im Verbund mit den nationalen Forschungslaboratorien Los Alamos, Lawrence Livermore und Sandia, den Supercomputer-Zentren, den Universitäten und der Industrie eine große technologische Offensive für den methodischen Ausbau innovativer Computersimulation /1-10/. Die ASCI-, HPCMP-, Pathforward- und PACI-Forschung und -Entwicklung ist geeignet, den wissenschaftlichen und technischen Wettbewerbsvorsprung der USA erheblich zu vergrößern, und wird die instrumentelle Ausstattung der dortigen Zentren mit parallelen Höchstleistungsrechnern auf Jahre hinaus nahezu konkurrenzlos verbessern. Die Supercomputer-Zentren des DoE und der NSF sind dabei die tragenden Säulen der übergreifenden strukturellen wissenschaftlichen Vernetzung für die neue *National Computational Infrastructure*. Für den Standort Deutschland erscheinen deshalb neue strategische Überlegungen zur Steigerung der Synergie in der Schlüsseltechnologie des Wissenschaftlichen Rechnens zwingend. So stellen sich die zunehmend dringlicheren Fragen, ob und wie die hiesigen Supercomputer-Zentren durch Integration mit den anderen Kompetenzzentren für das Wissenschaftliche Rechnen in einen kooperativen Verbund die methodische Innovation des Supercomputing und seiner Anwendungen in Wissenschaft und Forschung vorantreiben können, mit dem Verbund als Drehscheibe den Transfer der Methoden des Wissenschaftlichen Höchstleistungsrechnens in die Anwendungen in der Industrie noch stärker fördern und beschleunigen können, im engeren Kommunikationsverbund über Breitbandnetze und durch Entwicklung angemessener Schnittstellen und Betriebskonzepte ihre zunehmend heterogen bestückten Rechnerausstattungen zu wirkungsvolleren Nutzeffekten und damit zu einem höheren Mehrwert bringen können, und schließlich durch geeignete Koordinationsprozesse die Spitzenstellung im Supercomputing für den internationalen Wettbewerb von Wissenschaft und Wirtschaft in Deutschland dauerhaft absichern können.

2 Kompetenzstrukturen des Höchstleistungsrechnens

In den letzten Jahrzehnten sind Mathematik und Datenverarbeitung durch ihre Synthese zum Wissenschaftlichen Rechnen von Hilfswissenschaften zu *einer* strategischen Disziplin für die Wissenschaft, die Forschung und die industrielle Innovation geworden. Diese Methodik wird im Angelsächsischen treffend *Computational Science & Engineering* genannt. Neue Curricula müssen sie schon in der Lehre abstützen, denn die Problemstellungen in Wissenschaft und Technik verlangen nach immer umfassenderen und genaueren Modellbildungen für die komplexen Systeme und nach zunehmend leistungsfähigeren Methoden für die Problemlösung. Model-

lierung und Simulation werden dabei in steigendem Maße auch für die industrielle unverzichtbar. Die wesentliche methodische Grundlage der Computersimulation sind die mathematischen Verfahren. Ihre Effizienz im Verbund mit den Fortschritten der Rechner-technologie und -architektur bestimmt das Leistungsvermögen der Simulation. Ein fundamentales Hilfsmittel für wissenschaftliche und technische Erkenntnisse aus der Computersimulation ist die Visualisierung der komplexen Zusammenhänge mit Hilfe moderner Methoden der Computergraphik. Sie ist vor allem für die Behandlung und das Verständnis komplizierter dynamischer Vorgänge unabdingbar. Die neuen Konzepte der Modellbildung in der Wissenschaft und in der Produktentwicklung in der Industrie, „Virtuelles Labor“ und „Virtuelles Produkt“, gründen auf dem Potential der Visualisierungs- und Multimediatechniken, der Kommunikationstechnik und der kooperativen Arbeitsweisen.

Das Wissenschaftliche Rechnen ist somit vom Grunde auf interdisziplinär. Diese neue Technologie erfordert im Verbund mit dem Fachwissen und Systemverständnis der wissenschaftlichen oder technischen Einzeldisziplinen das volle informationstechnische Instrumentarium des Supercomputing und der Kommunikation. Sie verlangt nach großen Leistungssprüngen in den Rechnerarchitekturen. Die aus dem Zusammenwirken von Modellbildung, Computersimulation und Visualisierung resultierende Synthese aus mathematischer Methodik und informationstechnischem Instrumentarium hat die strategische Disziplin des Wissenschaftlichen Höchstleistungsrechnens als eine die internationale Wettbewerbsfähigkeit von Wissenschaft und Wirtschaft mitbestimmende Schlüsseltechnologie geschaffen. In den einschlägigen Strategiepapieren der forschungspolitisch bedeutsamen Institutionen zum High Performance Scientific Computing /11/ und in den Programmentwürfen der Regierungen in den USA, in der EU wie in Deutschland /12-20/ wird den Supercomputer-Zentren und deren Verbund – aufsetzend auf den als Infrastruktur unabdingbaren Datennetzen (*Data Highways*) und in enger Wechselwirkung mit der weithin verteilten Fachkompetenz – maßgebliche Bedeutung für den Aufbau und Ausbau dieser strategischen Disziplin und ihrer Anwendungen zugewiesen.

Nachdem der Wissenschaftsrat schon zu der hierzulande besonders kritischen Frage leistungsfähiger Datenkommunikation /21/ entschieden Stellung genommen hatte /22/, hat er im Juli 1995 seine Empfehlungen zur Versorgung von Wissenschaft und Forschung in Deutschland mit Höchstleistungsrechenkapazität ausgesprochen /23/, wobei er die von der DFG /19/ und von der NSF /15/ konzipierte Leistungspyramide für eine zeitgemäße informationstechnische Infrastruktur für die Versorgung mit Rechenkapazität zugrundelegt /24/. In den Supercomputer-Zentren in Jülich und Stuttgart ist die Rückkehr in die internationale Leistungsspitze bereits vollzogen, in Berlin und München in der Planung. Da die Leistungsspitze der Supercomputer die Größe und Feinheit der berechenbaren Modelle bestimmt, werden Forschung und Industrie in Zukunft dort zurückfallen müssen, wo solche Supercomputer der höchsten Klasse nicht verfügbar sind.

Ein wichtiger Schritt in der bundesweiten Versorgung der Wissenschaft und Forschung einschließlich industrieller Forschungsvorhaben mit Supercomputer-Kapazität ist 1987 durch die Einrichtung des HLRZ (*Höchstleistungsrechenzentrum*) durch KFA, DESY und GMD getan worden; das Zentralinstitut für Angewandte Mathematik des Forschungszentrum Jülich ist als Supercomputer-Zentrum der maßgebliche Leistungsträger für dieses Modell. Es war ein Novum hierzulande, daß Supercomputer-Kapazität bundesweit den Wissenschaftlern auf der Grundlage von wissenschaftlichen Forschungsvorschlägen, die nach dem DFG-Modell von Fachgutachtern (*Peer Reviewing*) bewertet werden, zugänglich gemacht wird – Modalitäten, wie sie seit geraumer Zeit auch im ZIB und im Stuttgarter Supercomputer-Zentrum zugrundegelegt werden. Die Einrichtung des Höchstleistungsrechenzentrums Stuttgart (HLRS) mit der engen Kopplung an die Industrie in Form der gemeinsam von der Universität Stuttgart, der Universität Karlsruhe, von dem Systemhaus debis in der Daimler-Benz AG sowie von der Firma Porsche getragenen Betriebsgesellschaft hww ist ein Schritt zur Umsetzung der Empfehlung des Wissenschaftsrates zum weiteren zügigen Auf- und Ausbau der Spitzenkapazitäten im Supercomputing in Deutschland. Gleichzeitig ist damit auch ein neuartiges Modell für die enge Kooperation zwischen Wissenschaft und Industrie auf dem strategischen Feld des Wissenschaftlichen Höchstleistungsrechnens in die faktische Erprobung überführt worden. Die Pläne des Landes Bayern und Berlins mit den norddeutschen Ländern für den zukünftigen Ausbau ihrer Supercomputer-Kapazitäten werden die infrastrukturellen Voraussetzungen für das in Deutschland verfügbare Potential zur Verstärkung des Höchstleistungsrechnens und damit der Schlüsseltechnologie des Wissenschaftlichen Rechnens am Wirtschaftsstandort Deutschland weiter verbessern.

3 Funktionen des Verbundes der Supercomputer-Zentren

Sowohl die technischen und tariflichen Gegebenheiten bei den Datennetzen als auch die föderale Struktur in Deutschland haben bislang einen länderübergreifenden Verbund von Rechenzentren nicht als ein natürliches Instrument der wissenschaftlichen Kooperation oder des ökonomischen Einsatzes von Rechnerressourcen erscheinen lassen. Als Ausnahmen müssen der sogenannte Norddeutsche Vektorrechner-Verbund (NVV), der im Rahmen von Staatsverträgen einen Rechenzeitausgleich zwischen den mit Hochleistungsrechnern ausgestatteten Zentren in Berlin (ZIB), in Hannover (RRZN) und an der Universität Kiel vorsieht, und die HLRZ-Kooperation gesehen werden. Die übergreifende Kompetenzstruktur bietet heute günstigere Voraussetzungen für den Verbund der Supercomputer-Zentren zur Nutzung neuer Konzepte des Computing wie *heterogenes Rechnen* und *Meta-computing* unter Einsatz der Breitbandkommunikation /25-27/.

Auch im Hinblick auf die Entwicklungen in den USA muß dabei festgestellt werden, daß die Supercomputer-Zentren für die Entwicklung des Wissenschaftlichen Rechnens unverzichtbare Strukturbildner sind.

So stellen sich die Fragen, ob und wie diese Supercomputer-Zentren

- durch eine engere Wechselwirkung mit den anderen Kompetenzzentren für das Wissenschaftliche Rechnen und deren Integration das Supercomputing und seine Anwendungen in Wissenschaft und Forschung vorantreiben können,
- insbesondere durch gemeinsame Projekte auf den Gebieten des technisch-naturwissenschaftlichen Supercomputing, der mathematischen Modellierung und der Methodik der Simulation sowie der Visualisierung in eine vertiefte Zusammenarbeit eintreten können,
- mit dem Verbund als Drehscheibe vor allem auch den Transfer der Methoden und Techniken dieser Schlüsseltechnologie in die Anwendungen und in die Produktentwicklung in Industrie und Wirtschaft noch stärker fördern und beschleunigen können,
- im engeren Kommunikationsverbund über Breitbandnetze und durch Entwicklung angemessener Schnittstellen und Betriebskonzepte ihre heterogenen Rechnerarchitekturen zu wirkungsvolleren Nutzeffekten und damit zu einem höheren Mehrwert bringen können,
- durch einen engen Kooperations- und Kommunikationsverbund die wissenschaftliche und technische Plattform für die zukünftigen Entwicklungsschritte der Breitbandkommunikation des B-WiN und seiner pilotartigen Erprobung schaffen können,
- durch geeignete wechselseitige Abstimmungs- und Koordinationsprozesse die langfristige Spitzenstellung der Supercomputer-Zentren in Deutschland für den internationalen Wettbewerb von Wissenschaft und Wirtschaft dauerhaft absichern können.

In den USA haben vor allem die zur Mitte der 80er Jahre von der National Science Foundation (*NSF*) eingerichteten *Supercomputer Centers* – neben den in den nationalen Forschungslaboratorien betriebenen, zu wichtigen Anteilen auch für die militärische Forschung genutzten Supercomputer-Zentren – die Methodik und die Anwendung der Höchstleistungsrechner vorangetrieben /28/. Ihr strategisches Ziel führte Anfang der 90er Jahre zur Begriffsdefinition des *Heterogeneous Computing* und des *Metacomputing* und zum Konzept des *Metacenter* /25,26/. Die neuen Programme zur Verbesserung der *National Computational Infrastructure* setzen diese Strategie verstärkt fort. Mit dem *vBNS* (*very high speed Backbone Network Service*) steht heute über den Kontinent hinweg ein Hochleistungsnetz auf Gigabit-Niveau (OC-3, OC-12) zur exklusiven Nutzung für die Wissenschaft zur Verfügung. Parallel dazu laufen die Vorbereitungen für das der Wissenschaft und Forschung reservierte *Internet II* sowie für das *Next Generation Internet* /29/.

Der Ansatz eines Verbundes der Supercomputer-Zentren geht nicht davon aus, daß durch einen solchen Verbund – wie früher gelegentlich in den Raum gestellt – endlich die großen Rechner in den Zentren voll ausgelastet werden sollten und könnten und somit ein überregionaler Lastverbund die wünschenswerte Lösung aller Fehlbelegungsprobleme böte. Die Vorstellung eines Lastverbundes muß vielmehr abgelöst werden durch einen Funktionsverbund, der dabei nicht nur von der Vielfalt der verfügbaren Supercomputer-Architekturen ausgeht, sondern auch das breite Spektrum großer Software-Systeme für den Einsatz in Wissenschaft und Forschung, Technik und Industrie in die Struktur- und Nutzungsmodalitäten des Verbundes einbezieht. Denn sowohl technische und architektonische Gründe als auch lizenzrechtliche und wirtschaftliche Kriterien sowie Aspekte der Kompetenzstruktur lassen eine gewisse

Spezialisierung der Zentren im Verbund hinsichtlich der (kommerziellen) Anwendungssoftware und auch der anwendungsseitigen Schwerpunktlagen sinnvoll erscheinen. Für einen solchen Funktionsverbund ist es erforderlich, die regionalen Hürden zu überwinden, die es bislang erschwerten, die wechselseitige Bereitstellung von Rechnerressourcen für die Nutzung durch nichtlokale oder überregionale Anwender in einem sinnvollen Rahmen offiziell zu gestatten. So müßte zukünftig ein wechselseitiger Austausch von Rechnerressourcen durch äquivalente Nutzungsanteile garantiert werden, deren Wechselkurs durch die Accounting-Systeme und in dynamischer Anpassung an die jeweilige Umgebung geregelt wird.

Mit dem Blick auf die „großen Herausforderungen“ bei den Anwendungen ergeben sich für einen solchen Verbund der Supercomputer-Zentren aus der Vereinigung homogener Supercomputer-Architekturen, etwa durch Kopplung identischer Mehrprozessor-Vektorrechner oder identischer massiv-paralleler Rechner, attraktive Perspektiven für die Behandlung außerordentlich großer (homogener) Probleme hinsichtlich Gesamtleistung und Speichergröße. Darüber hinaus sollen sich in der Zukunft gerade Supercomputer in ihrer Vielfalt aus der Vereinigung von Mehrprozessor-Vektorrechnern mit massiv-parallelen Rechnern unterschiedlicher Provenienz zu einem heterogenen Rechner-Ensemble – mit Nutz- und Synergieeffekten – zur Lösung sehr großer Anwendungsprobleme einsetzen lassen. Denn große Anwendungen vor allem in der Technik und in den technikenahen Forschungsgebieten sind in aller Regel nicht homogen, so daß die Entwicklung des neuartigen Konzeptes des heterogenen Supercomputing in einem solchen Verbund der Supercomputer-Zentren bald Früchte tragen könnte.

Aufgrund der haushaltsrechtlich notwendigen Amortisationszeiten der Rechanlagen und der Budgetierungszyklen der Länder für die Ausstattung der Hochschulrechenzentren sind bislang Standzeiten von mehr als fünf, in manchen Fällen sogar von mehr als zehn Jahren zu vermerken. Hinzu kommt, daß sich der Technologieschub bei den Workstations mit den großen Verbesserungen des Preis/Leistungsverhältnisses im Zuge der Ablösung der Universalrechner durch Client-Server-Strukturen zeitweilig in einer depressiven Phase für das Supercomputing, insbesondere für das Vektorrechnen, niedergeschlagen hat; dieser Effekt ist in der Wirkung durch die Verzögerungen im Reifeprozess der massiv-parallelen Rechner und durch das Scheitern einiger Hersteller solcher Anlagen noch verstärkt worden. Der Wissenschaftsrat hat sich in seiner Empfehlung zur Einrichtung und Weiterentwicklung der Supercomputer-Zentren für eine deutliche Verringerung der Standzeiten ausgesprochen, allerdings ohne die faktischen Barrieren für die bisher in der Regel zu langen Standzeiten abreißen zu können. Deshalb ist es wichtig, die Innovation der Supercomputer-Zentren auch und zunächst auf anderen Wegen zu sichern. Die Empfehlung des Wissenschaftsrates sieht bis zu vier in der internationalen Spitze der Leistungspyramide stehende deutsche Supercomputer-Zentren vor, die sich aus heutiger Einschätzung klar herauskristallisieren. Ein einzelnes dieser entweder vom Bund getragenen – wie im Forschungszentrum Jülich – oder im Rahmen des HBFG vom jeweiligen Bundesland

und dem Bund investiv ausgestatteten Supercomputer-Zentren – wie im LRZ, RUS und ZIB – wird sich daher aus heutiger Sicht nicht zu allen Zeiten aus eigener Kraft und dauerhaft mit seinen Höchstleistungsrechnern an der Spitze der Leistungspyramide plazieren können; im Vergleich zu den erforderlichen oder zugemuteten Standzeiten erfolgt der relative Verfall der Rechnerleistung zu schnell. Im Hinblick auf die Dynamik der Rechnertechnologie müssen daher geeignete Konzepte und Instrumente zur Erhöhung der Flexibilität entwickelt werden, um der Wissenschaft, der Forschung und der Industrie auch langfristig den Zugang zur Leistungsspitze des Supercomputing zu sichern. Das Ziel des Wissenschaftsrates, Deutschland durchgängig an der Spitze des Supercomputing sehen zu wollen, muß sich deshalb auf eine Innovationsspirale gründen, die von allen Supercomputer-Zentren phasenverschoben gemeinsam gedreht wird, indem große Beschaffungen neuer Supercomputer der höchsten Leistungsklasse koordiniert in geeignet zeitlich versetzter Weise getätigt werden. Dadurch kann erreicht werden, daß in Deutschland zu jeder Zeit die neuesten Rechnerarchitekturen für das wissenschaftlich-technische Supercomputing zur Verfügung stehen. Dies wiederum hätte als notwendige, aber sicherlich auch hinreichende Bedingung die eine solche übergreifende Strategie absichernde, langfristige Haushaltsplanung im Bund und in den Ländern zur Voraussetzung.

4 Anforderungen des Verbundes der Supercomputer-Zentren

Es ist zweifelsfrei, daß die Umsetzung eines solchen *Metacenter*-Konzeptes /26/ nicht nur leistungsstarke Netzinfrastrukturen für *Local Area Networks* (LANs) und *Wide Area Networks* (WANs) voraussetzt; der Aufbau und die Weiterentwicklung von Breitbandnetzwerken ist im Rahmen dieser Aufgabenstellung unabdingbar. Wie für den Weg Deutschlands in die Informationsgesellschaft /27/ nicht nur das Umsetzen und Vordringen der Multimedia-Techniken und -Anwendungen in die Arbeitswelt (wie etwa in die medizinische Diagnostik oder in den Produktentwurf sowie in die Unterhaltungsbranche) nachhaltig verbesserte Breitbandkommunikation verlangen, so erwachsen aus den Anforderungen an einen Verbund der Supercomputer-Zentren stetig sich verschärfende Bedingungen an die übergreifende Netzinfrastruktur.

Aus dem Bedarf an leistungsfähigen Datennetzen für den Verbund der Supercomputer-Zentren läßt sich – entsprechend der Entwicklung und dem Unterhalt eines leistungsfähigen Landstraßen- und Autobahnnetzes – die langfristige gesamtstaatliche Aufgabe zum Erhalt und Ausbau der Breitbandkommunikation in immer neuen Innovationsschritten zur Förderung der Schlüsseltechnologie des Wissenschaftlichen Rechnens in Wissenschaft und Wirtschaft ableiten. Diese Feststellung berücksichtigt dabei voll die Fortschritte, die durch die verschiedenen Leistungsstufen des Deutschen Forschungsnetzes über 2 Mbps in den vergangenen Jahren zu 34 Mbps im Frühjahr 1996 (und im Prinzip zu 155 Mbps und darüber) zum Nutzen der deutschen Wissenschaft und Forschung erzielt worden sind. Die bisherige Tarifsituation erschwerte und erschwert jedoch noch heute die flächendeckende Versorgung der deutschen Wissenschaft und erst recht deren enge Ankopplung an die industriellen

Labors und Schwerpunkte, zumal der kleinen und mittleren Unternehmen. Die seit dem Frühjahr 1996 mit dem B-WiN zur Verfügung stehende Netzinfrastruktur hat erfreuliche Signale gesetzt und die Datenkommunikation in Wissenschaft und Forschung nachdrücklich befördert. Allerdings ist bereits heute mit der Nutzung der im Internet verfügbaren Dienste die Kommunikationskapazität in vielen Bereichen weitgehend aufgezehrt, zumal es sich bei den bereitgestellten 34 Mbps lediglich um die Anschlußrate, jedoch nicht um die Nutzrate handelt. Die erfolgreiche Umsetzung eines Konzeptes zur schnellen Kopplung von Höchstleistungsrechnern an den vier Standorten verlangt Kommunikationsbandbreiten, die die heute im DFN im Rahmen des B-WiN angebotenen Werte bei weitem überschreiten. Zudem ist die Garantie einer Dienstgüte unumgänglich, was die gemeinsame Nutzung der Netzinfrastruktur des B-WiN – in direkter Konkurrenz zum Internet – zumindest bei heute standardmäßig angebotenen Bandbreiten ausschließt.

Als Folgerung ergibt sich daher zwingend, daß die Nutzrate der Breitbandvernetzung für den Verbund der Supercomputer-Zentren auf keinen Fall in Konkurrenz zu den Bedürfnissen der Internet-Nutzung stehen darf, sondern dafür eine eigenständige, angemessene Versorgung – über eine individuelle Bandbreitenreservierung im B-WiN auf entsprechend hohem Niveau – sichergestellt werden müßte. Damit könnte zudem die Pilotstufe für die nächste Netzgeneration eingeläutet und die jeweils modernste Netz- und Anschlußtechnologie getestet und unter Produktionsbedingungen erprobt werden. Dieser Ansatz könnte auf der Basis einer langfristigen engen Zusammenarbeit der Supercomputer-Zentren mit dem DFN und einem Netz-Provider verwirklicht werden und in Konzeption und Spezifikation im Rahmen von erneuerbaren Pilotprojekten dieser Partner den jeweiligen Anforderungen des Verbundes technisch angepaßt werden. Diese Pilotprojekte könnten dabei als die innovativen Vorläufer der zukünftigen B-WiN-Entwicklungsstufen fungieren. Der Verbund böte somit das strukturelle Gerüst für die nächsten Pilotstufen des B-WiN. Dieses Konzept würde die mit dem Aufbau der regionalen ATM-Testbeds und der Gigabit-Testbeds definierten Ziele sehr nutzbringend ergänzen.

Hinsichtlich der bereits angesprochenen gesamtstaatlichen Aufgabe sollte seitens des Bundes aus den überdurchschnittlichen Anforderungen des Verbundes an die Breitbanddatenkommunikation und dessen anderen technisch-wissenschaftlichen Herausforderungen ein langfristig auszulegendes innovatives Forschungsprogramm formuliert werden, dessen Perspektiven und Ergebnisse auch eine ausgezeichnete Grundlage wären für die Präsenz der deutschen Wissenschaft, Forschung und Industrie im Zuge der für die Zukunft unabdingbaren Breitbandvernetzung von Supercomputer-Zentren und Aktivitätszentren des Wissenschaftlichen Rechnens innerhalb der Europäischen Union und im Zusammenwirken mit den entsprechenden Aktivitätszentren in den USA und Japan.

Für die Nutzung der in einem WAN-Rechnerverbund verteilt verfügbaren Ressourcen, für das heterogene Rechnen und letztendlich für das – in Bezug auf Organisation

und Technik noch aufwendigere – Metacomputing sind mittelfristig leistungsfähige Software-Produkte nötig, die die Anwender geeignet unterstützen und damit von einer Vielzahl von heute noch zwingend notwendigen Arbeitsschritten entlasten. Zur Erreichung dieses Zieles wird der Verbund – eng gekoppelt mit dem technischen Fortschritt auf diesem Gebiet – zum einen verfügbare Lösungen schnell aufgreifen und zum anderen gewisse Software-Arbeiten auch forcieren müssen. Die technischen Randbedingungen und Anforderungen an Software-Produkte zur Unterstützung eines *Seamless Computing* (mit geeigneten Kommunikationsbibliotheken zur quasi gleichzeitigen Nutzung von heterogenen Rechnerarchitekturen durch eine Anwendung, leistungsfähige Scheduling-Strategien zur abgestimmten und kooperativen Ausführung von Anwendungen unter Nutzung einer WAN-Netzinfrastruktur, Optimierungswerkzeuge zum Optimieren von Anwendungsprogrammen in einem derartigen Rechnerverbund) sind bisher erst in Einzelfällen aufgezeigt worden; eine weitgehende Lösung der damit verbundenen Probleme läßt sich sicher auch nur in enger Wechselwirkung mit den Rechnerherstellern erzielen. Die vier Supercomputer-Zentren, die führenden Supercomputer-Hersteller (SGI/Cray Research, Fujitsu, IBM, NEC, Siemens/Nixdorf), zwei deutsche Software-Firmen (Genias, Pallas) sowie die Universitäten Karlsruhe und Paderborn, die Technische Hochschule Aachen, der Deutsche Wetterdienst (DWD) und das ECMWF haben 1997 ein Projekt definiert, das die Schritte zu einem derartigen *Seamless Interface* unternimmt: UNICORE (Uniformes Interface für Computer-Ressourcen). UNICORE wird über den Projektträger Informationstechnik durch den BMBF gefördert; die Projektleitung hat das Zentralinstitut für Angewandte Mathematik des Forschungszentrums Jülich.

Die Nutzung der Rechnerressourcen in den Supercomputer-Zentren durch Wissenschaft und Forschung wird heute schon und in der Zukunft sicher noch verstärkt durch die Begutachtung der wissenschaftlichen Qualität und Relevanz der Vorhaben im Rahmen eines Antragswesens geregelt, wobei den Lenkungsausschüssen und wissenschaftlichen Beiräten etc. eine maßgebliche Funktion zukommt. Der Austausch solcher Ressourcen im Verbund setzt die wechselseitige Anerkennung dieser Voten voraus. Dazu müssen geeignete Vereinbarungen zwischen den Instanzen der Zentren getroffen werden. Wünschenswert ist dabei sicher auch, daß eine wechselseitige Information über Projektanträge auf Nutzung der Rechner gewährleistet wird, insbesondere auch um redundante Anträge mit Doppelbegutachtungen und -bewilligungen tunlichst zu vermeiden. Die Nutzung der Ressourcen durch Industrie und Wirtschaft andererseits wird stets Sonderregelungen unterliegen müssen.

Die beteiligten Institutionen des Verbundes können insbesondere über gemeinsame Workshops, Kurse und Seminare – als notwendige Begleitung und Weiterbildungsaktivität – den Informationsaustausch zwischen den Verbund- und den Projektpartnern fördern und gleichzeitig landesweit ein Forum für den wissenschaftlichen und technischen Austausch zwischen Supercomputer-Zentren, Kompetenzzentren und industriellen Anwendern bieten. Darüber hinaus lassen sich vielfältige Kooperationsfelder einerseits für die Supercomputer-Zentren untereinander und andererseits

für deren Zusammenarbeit mit den Kompetenzzentren identifizieren /30/. Voraussetzung für die erfolgreiche Zusammenarbeit ist dauerhaftes vertrauensvolles Zusammenwirken des Managements der Supercomputer-Zentren. Das läßt sich durch einen ständigen Arbeitskreis aus den Direktoren dieser Supercomputer-Zentren erzielen, der die geeignete qualifizierte Plattform für die strategische und taktische Abstimmung zwischen den Supercomputer-Zentren bei den Planungsprozessen im Hinblick auf die globalen Ziele bildet.

5 Empfehlungen, Vorschläge und Maßnahmen

Neben den technischen und tariflichen Gegebenheiten bei den Datennetzen haben vor allem die mit der föderalen Struktur in Deutschland verbundenen Fragen den seit langem wünschenswerten länderübergreifenden Verbund von Rechenzentren nicht als ein leicht zu bauendes Gerüst erscheinen lassen. Auch heute können die mit einem länderübergreifenden Verbund von Rechnerressourcen verknüpften Fragen, die das Haushaltsrecht der Länder aufwirft, nicht *de facto* ignoriert werden, noch lassen sich die daraus entstehenden Barrieren für die Verwirklichung eines solchen Verbundes *de iure* im Grundsatz und in Mittelfrist abtragen. Die grundsätzliche Lösung dieser Probleme wäre ein langwieriger Prozeß, dessen Zeitrahmen den anwendungsseitigen Bedürfnissen nicht Rechnung tragen könnte und würde.

Die Machbarkeitsanalyse /30/ gibt die folgenden Empfehlungen für Maßnahmen zu einem Verbund der Supercomputer-Zentren in Deutschland:

1. Einrichtung eines ständigen Arbeitskreises aus den Direktoren der Supercomputer-Zentren zur strategischen und taktischen Abstimmung bei den Planungsprozessen, Innovationsschritten, Einsatzziele und Betriebsformen für die Supercomputer-Ressourcen.
2. Einrichtung einer Kongregation aus den Vorsitzenden der Lenkungsausschüsse, Wissenschaftlichen Beiräte etc. für die Supercomputer-Zentren zwecks Informationsaustausch und Abstimmung hinsichtlich der ihnen obliegenden Aufgaben der Rechenzeitvergabe, der Begutachtungsverfahren und der Empfehlungen zur Fortentwicklung der Supercomputer-Ressourcen in den Zentren.
3. BMBF-Projektförderung eines Breitbandnetzes mit garantierter Dienstgüte für den Höchstleistungsverbund der Supercomputer-Zentren im Rahmen des B-WiN des DFN: Dieses den technisch möglichen Innovationsschritten der Kommunikationstechnik anzupassende dedizierte Netzwerk soll gleichzeitig – ähnlich den vom BMBF über das DFN geförderten Gigabit-Testbeds – als unter den Produktionsbedingungen des Verbundes erprobtes Pilotsystem für die jeweils nächste Ertüchtigungsstufe des B-WiN dienen.
4. BMBF-Projektförderung der Software-Entwicklung eines „Seamless Interface“ für den Verbund zwischen den Supercomputer-Zentren und für die Integration der Kompetenzzentren: Das Projekt UNICORE wird seit 1997 über den Projektträger Informationstechnik vom BMBF als Verbundprojekt zwischen Supercomputer-Herstellern, KMUs und Supercomputer- sowie Kompetenzzentren gefördert.

5. BMBF-Förderung von Forschungs- und Entwicklungsprojekten in einem eigenständigen Schwerpunkt (HPSC) der BMBF-Förderprogramme zur Erschließung neuer Anwendungen mit vollständigen Lösungen im Verbund der Supercomputer-Zentren.
6. BMBF-Förderung eines Mobilitäts-, Austausch- und Gästeprogrammes und der gemeinsamen Aus- und Weiterbildungsaktivitäten (Ferienschulen).

Referenzen

1. L. Smarr, Toward the 21st Century, Comm. ACM 40(1997), No. 11, 28-32.
2. Ph. L. Smith, The NSF Partnerships and the Tradition of U.S. Science and Engineering, Comm. ACM 40(1997), No. 11, 35-37.
3. D. A. Reed et al., Distributed Data and Immersive Collaboration, Comm. ACM 40(1997), No. 11, 39-48.
4. R. Stevens et al., From the I-Way to the National Technology Grid, Comm. ACM 40(1997), No. 11, 51-60.
5. K. Kennedy et al., A Nationwide Parallel Computing Environment, Comm. ACM 40(1997), No. 11, 63-72.
6. G. J. McRae, How Application Domains Define Requirements for the Grid, Comm. ACM 40(1997), No. 11, 75-83.
7. J. P. Ostriker and M. L. Norman, Cosmology of the Early Universe Viewed Through the New Infrastructure, Comm. ACM 40(1997), No. 11, 85-94.
8. ASCI: www.llnl.gov/asci/.
9. ASCI-Pathforward: www.llnl.gov/asci-pathforward/.
10. HPCMP: www.hpcm.dren.net/.
11. Special Double Issue: Grand Challenges to Computational Science, Future Generation Computer Systems 5 (1989), No. 2&3.
12. Committee on Physical, Mathematical, and Engineering Sciences, Federal Coordinating Council for Science, Engineering, and Technology, Grand Challenges 1993: High Performance Computing and Communications, The FY 1993 U.S. Research and Development Program, Office of Science and Technology Policy, Washington, 1992.
13. Board on Mathematical Sciences of the National Research Council (USA), The David II Report: Renewing U.S. Mathematics - A Plan for the 1990s, in: Notices of the American Mathematical Society, May/June 1990, 542-546; September 1990, 813-837; October 1990, 984-1004.
14. The Congress of the United States, Congressional Budget Office, Promoting High-Performance Computing and Communications, Washington, June 1993.
15. NSF Blue Ribbon Panel on High Performance Computing, From Desktop To Teraflop: Exploiting the U.S. Lead in High Performance Computing, Report, NSF-CISE, October 1993.

16. Commission of the European Communities, Report of the EEC Working Group on High-Performance Computing (Chairman: C. Rubbia), February 1991.
17. High-Performance Computing Applications Requirements Group, High-Performance Computing and Networking, Report, European Union, April 1994. - High-Performance Networking Requirements Group, Report, European Union, April 1994.
18. U. Trottenberg et al., Situation und Erfordernisse des wissenschaftlichen Höchstleistungsrechnens in Deutschland - Memorandum zur Initiative High Performance Scientific Computing (HPSC), Februar 1992, published in: Informatik-Spektrum 15(1992), H. 4, 218.
19. Deutsche Forschungsgemeinschaft, Kommission für Rechenanlagen, Zur Ausstattung der Hochschulen in der Bundesrepublik Deutschland mit Datenverarbeitungskapazität für die Jahre 1992–1995, DFG, Bonn, Dezember 1991.
20. Bundesministerium für Forschung und Technologie, Initiative zur Förderung des parallelen Höchstleistungsrechnens in Wissenschaft und Wirtschaft, BMFT, Bonn, Juni 1993.
21. R. Bayer, Plädoyer für eine Nationale Informations-Infrastruktur, Informatik-Spektrum 17 (1994), H. 5, 302.
22. Wissenschaftsrat, Empfehlungen zur Bereitstellung leistungsfähiger Kommunikationsnetze für die Wissenschaft, Saarbrücken, 19. Mai 1995.
23. Wissenschaftsrat, Empfehlung zur Versorgung von Wissenschaft und Forschung mit Höchstleistungsrechenkapazität, Kiel, 7. Juli 1995.
24. J. J. Dongarra, H.-W. Meuer, and E. Strohmaier (eds.), TOP500 Report 1997, RUM 50/97, University of Mannheim, Germany, June 19, 1997.
25. A. A. Khokhar et al., Heterogeneous Computing: Challenges and Opportunities, IEEE Computer 26 (1993), No. 6, 18.
26. L. Smarr and Ch. E. Catlett, Metacomputing, Comm. ACM 35(1992), No. 6, 44.
27. Der Rat für Forschung, Technologie und Innovation, Informationsgesellschaft - Chancen, Innovationen und Herausforderungen - Feststellungen und Empfehlungen, Herausgeber: BMBF, Dezember 1995.
28. Report of the Task Force on the Future of the NSF Supercomputer Centers Program, National Science Foundation, USA, September 15, 1995.
29. S.N. Goldstein, Approaching the Gigabit Networking Threshold in the U.S., National Science Foundation, USA, January 29, 1997.
30. F. Hoßfeld et al., Verbund der Supercomputer-Zentren in Deutschland – eine Machbarkeitsanalyse, Oktober 1997 (BMBF-Förderkennzeichen '01 IR 602/9').